



3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.

Минск, БЕЛАРУСЬ

Спектральное исследование взаимодействия
разнозаряженных тетрапиррольных макрогетероциклических
соединений

В.А.Кулёв, Н.Л.Печникова, Т.А.Агеева

*Ивановский государственный химико-технологический университет, пр.
Шереметьевский, г. Иваново, Российская Федерация, e-mail: slava.kulev@mail.ru*

Интересной областью исследований тетрапиррольных макрогетероциклических соединений является образование супрамолекулярных димерных системах с переносом заряда, которые могут стать основой для создания органических проводников, каталитических и сенсорных систем, а также для изучения процессов фотосинтеза.

В данной работе были исследованы процессы, протекающие при взаимодействии 5,10,15,20-тетраakis(1-гексилпиридиний-4-ил)порфина тетрабромида ($\text{H}_2\text{P}(\text{Py}^+\text{C}_6\text{H}_{13}\text{Br}^-)_4$) и его кобальтового комплекса ($\text{CoP}(\text{Py}^+\text{C}_6\text{H}_{13}\text{Br}^-)_4$) с карбоксифталоцианинатами металлов в среде диметилсульфоксида. Установлены структуры полученных гетерокомплексов и характер межмолекулярного взаимодействия макроциклов.

Показано, что в случае взаимодействия $\text{CoP}(\text{Py}^+\text{C}_6\text{H}_{13}\text{Br}^-)_4$ и фталоцианинатов металлов получают гетерокомплексы эквимольного состава. В то время как с участием $\text{H}_2\text{P}(\text{Py}^+\text{C}_6\text{H}_{13}\text{Br}^-)_4$ происходит образование комплексов, в которых на одну молекулу порфирина проходятся две молекулы фталоцианина. Данный факт объясняется сильной координационной способностью диметилсульфоксида, в виду чего ион металла в составе комплексов макроциклов находится в виде пятикоординированной квадратной пирамиды и лишь одна сторона макроцикла остаётся доступной для образования гетерокомплекса.

Обнаружено, что в процессе получения гетерокомплекса происходит сильное снижение интенсивности полос поглощения в ЭСП и флуоресценции, соответствующих исходным соединениям и ответственных за π - π^* переходы. Данный факт демонстрирует наличие взаимодействия π -систем макроциклов.

По результатам квантово-химического моделирования можно утверждать, что в гетерокомплексе молекула фталоцианината металла выступает в качестве сильного акцептора, а молекула порфирина – донора. При этом наблюдается смещение электронной плотности в сторону координационной полости фталоцианината металла. Из чего следует, что внутри полученного гетерокомплекса протекают процессы с переносом заряда. Работа выполнена при поддержке Государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации (тема № FZZW-2023-0009)